



TITLE:

Van Hove limit : MicroからMacroへの階層移行(基研長期研究会「進化の力学への場の理論的アプローチ」報告,研究会報告)

AUTHOR(S):

一柳, 正和

---

CITATION:

一柳, 正和. Van Hove limit : MicroからMacroへの階層移行(基研長期研究会「進化の力学への場の理論的アプローチ」報告,研究会報告). 物性研究 1988, 51(2): 39-49

ISSUE DATE:

1988-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93517>

RIGHT:

## Van Hove limit—Micro から Macro への階層移行

阪大・工 一 柳 正 和

## § 1 はじめに

自然界は、種々の階層構造を示している。各々の階層には固有の法則が見出されるが、各階層の法則はより低い階層のものから最終的には導かれると考えられている。最も典型的な例が、熱力学的法則と力学的法則との相互関連性、相互移行である。この例では、完全な可逆性で特徴づけられる微視的法則（量子力学）から不可逆的法則を導出することである。BoltzmannによるH定理の提言が最初のものであった。この様な階層間の関連づけは、非平衡相転移現象や構造形成等の微視的理論の展開に不可欠なものである。

ところで、階層移行の一般的な議論をするとき、時空概念自身の成り立ちについて反省する必要にせまられる。量子力学（or Newton力学）では、我々は絶対的時空間というものを常に措定する。熱力学的法則の記述に現れる時空も、microの法則を記述するこの絶対時空と異ならないと期待している訳である。しかし、よく考えてみると熱力学的な「一瞬」は量子力学的には近似的に「無限大」に対応することに気づく。物理的事象の生起する「瞬間」を他と関連なしに云々することは、果して意味があるのだろうか。微視的粒子の時間・空間座標を決定するとするならば、その事を実行する装置は巨視的とならざるをえないのであり、マクロ系の時空とミクロ系の時空とは本来的に異ならざるをえないのである。この点は、前回の研究会で小嶋氏が強調された（素粒子論研究、'87年3月号；物性研究、'87年2月号所収）。BoltzmannのH定理では、この事情は「統計性介入」のうちに見だされる。Boltzmann方程式の導出に当っては、粒子密度 $\rightarrow 0$ の極限操作が不可欠であって、このとき平均自由行程と平均飛行時間は共に $\infty$ になってしまっており、物理的に正しい描像を得るためには、空間的スケールと時間的スケールを同時に都合良くスケール変換する必要があった。このスケール変換が、「統計性介入」と理解される概念装置なのである。Onsagerは、彼の相互定理の証明の際、micro力学とmacro力学とでの時間微分の意味の違いを巧みに利用した。彼の方法では、熱力学的流れ $\dot{\alpha}$ は、時間微分としてではなく単に $\{\alpha(t+\tau) - \alpha(t)\}/\tau$ （ここで $\tau \rightarrow 0$ は許されない）としたことは、時間スケールの変換を意味する。この事情については、Casimir [Rev. mod. Phys. 17 ('45) 343] の論文を参照されたい。<sup>[注1]</sup>

Onsagerの相反定理の証明から半世紀、その後線型応答理論が確立されてからも30年が経過した。これらは、今日では、教科書的段階にある。しかしながら、必らずしも充分に理解され尽してはいないの

〔脚注1〕これに関して故高橋秀俊氏は、次のように述べている〔物理学会誌40(1985)3号〕。「久保理論は線形応答係数とゆらぎとを関係づけるわけですが、例えば、電流が電界の一次に比例するという線形応答とは実際は複雑なものを平均したものであり、その複雑なものを微分したりするわけですので、平均をとることによって滑らかになるというのが線形応答理論の主張ですが、実際に滑らかになるかどうか、それが微分可能かどうか、という点の保証はないわけです。例えば Ohm の法則というのが成り立つと言いますが、Ohm の法則は飽くまで経験法であるのですから、そのようなものに対してああいう議論をするのはどうかということです。私はこの疑問点を1953年の京都での国際理論物理学会議での僕の講演の中でコメントしたら、Onsagerはそれに対して、そんな心配をする必要はないということを行ったように思います。」

ではなかろうか。脚注に示した Onsager の高橋氏への回答は、彼の直観によるもののようである以上には、何に基因して時間のスケールが決定されるかを示していない。不可逆過程の課題が一つの階層 (Onsager の場合は, thermostatics) 内に閉じ得るものであるならば, Onsager の回答で満足することもできよう。しかし, 我々の求めているものは, 不可逆過程論の原子論的基盤なのである。

van Hove の理論は, Pauli による master 方程式導出の方法に深い反省を加えることから出発し, 散逸をもたらす擾動には特別の構造が要求され, その事に基因して時間のスケール変換が必然的に導入されることを示した最初の理論であった。<sup>[注2]</sup>

この総合報告では, van Hove 理論が, 70 年代に新しい数学的展開を示したことを中心に述べる。van Hove が見出した散逸をもたらす擾動の条件は, 注目する物理系とその環境との相互作用において実現される。熱浴に接した系での動力学的きわめて一般的性質が, 熱浴の自由度を完全に消去するときの完全正写像によって系の代数的特徴 (動力学的半群) として理解されるようになった。多粒子系の力学法則と H 定理とは階層を異にするということをマクロとミクロの時空構造の違いと理解できるのである。

## §2 連続スペクトルを有する系の“平衡状態への接近”

Boltzmann は, 常に molecular chaos の仮定が許されるならば, 不可逆性を示す方程式 — Boltzmann 方程式 — が導出できることを示した。対応する仮定は量子力学系では Pauli の repeated random phase の仮定である。van Hove ('55 年) は, 量子系での平衡状態への接近を何らかの擾動の結果であると期待するとき, 上記の Pauli の仮定は, 初期時刻における密度行列の構造 (粒子間にいかなる相関も存在しない。従って, 粒子間の相関は, 擾動によって「創造される」) で置き換えられることを示した。<sup>1-6)</sup>

次の Hamiltonian で記述される巨視的物理系を考える:

$$H^\lambda = H + \lambda V, \quad (\lambda; \text{無次元のパラメーター}). \quad (1)$$

ここで  $H$  は無擾動系の Hamiltonian である。例えば,  $H$  は自由粒子系の Hamiltonian であり,  $\lambda V$  は粒子間の相互作用を表わす。重要な点は,  $H$  の系は ergodic でない事と  $H$  の spectrum は連続である事の二点である。 $H$  の固有状態の完全系が存在するとしよう:

$$H|\alpha\rangle = \epsilon(\alpha)|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (2)$$

$\lambda V$  に関する擾動論において,

$$\langle\alpha|V A_1 V \cdots A_k V|\alpha'\rangle = \delta(\alpha - \alpha') F(\alpha) + F_2(\alpha, \alpha') \quad (3)$$

のように,  $\delta$ -函数的 singularity が現れる。但し,  $A_i$  は  $|\alpha\rangle$  に関して対角な演算子。今, 系の初期状態

[脚注 2] plateau value という物理的事実を背景に, Kirkwood は時間平均操作という概念を導入した。Mori-Oppenheim-Ross [Studies in St. Mech. Vol. 1 (1962)] は, 粒子間の衝突過程の力学の詳細に無頓着な時間スケールの導入が Kirkwood の時間平均操作と数学的に同じであるとした。van Hove 理論はこれとは異なる枠組である。

が

$$|\varphi(t=0)\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |\alpha\rangle, \quad \left(\int d\alpha |c(\alpha)|^2 = 1\right), \quad (4)$$

で与えられたとすると、時刻  $t (> 0)$  の状態は

$$|\varphi(t)\rangle = U_t^\lambda |\varphi(0)\rangle, \quad U_t^\lambda = \exp \{-it(H + \lambda V)\}. \quad (5)$$

ここで確率密度を次式で定義する：

$$\langle \varphi(t) | A | \varphi(t) \rangle = \int d\alpha A(\alpha) p_t(\alpha). \quad (6)$$

(3) 式に対応して  $\langle \alpha | U_{-t}^\lambda A U_t^\lambda | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha', f_1(\alpha; t) + f_2(\alpha, \alpha'; t))$  を用いると

$$p_t(\alpha'') = \int d\alpha |c(\alpha)|^2 P(t; \alpha'', \alpha) + \int d\alpha d\alpha' I(t; \alpha'', \alpha', \alpha) c^*(\alpha) c(\alpha') \quad (7)$$

を得るが、(7) 式の第2項は、初期条件として、random phaseを仮定すれば消える。また、運動方程式は

$$\frac{d}{d\tau} p_\tau(\alpha) = \int d\alpha' [w(\alpha, \alpha') p_\tau(\alpha') - w(\alpha', \alpha) p_\tau(\alpha)] \quad (8)$$

となる。但し、スケール変換した時間変数  $\tau$  は

$$\tau = \lambda^2 t \quad (t \rightarrow \infty, \lambda \rightarrow 0; \tau = \text{一定}) \quad (9)$$

と定義した。(9) が van Hove limit である。

ここで注意すべきことは、上述のように van Hove は、「平衡状態への接近」に証明を与えたのではあるが、「不可逆性の発現＝散逸過程の必然性」を示すものではなかったという点である。この二つは時として同意義と解されたが、元来異なる概念である「文献16」。「平衡状態への接近」とは、あくまでも  $t \rightarrow \infty$  で全ての物理量に対して時間平均  $\langle G \rangle_t$  が平衡アンサンブルでの平均値  $\langle G \rangle_{eq}$  に接近することであり、そこでのエントロピーの不可逆的成生（輸送係数の存在）を論ずるものではなかった。勿論、この二者が本元的に関連すると予想することは自然である。

### § 3 離散スペクトルの系 — 熱浴の自由度の導入

離散スペクトルの系では、このままでは、van Hove の手法を有効に機能させることができない。diagonal singularity を発現さす別の機構を持ち込まなくてはならない。その代表的方法が（無限に大きい）熱浴の自由度（量子化された）を導入する方法である。熱浴の Hamiltonian（勿論、non-ergodic）のスペクトルが連続ならば、van Hove の方法が有効に働き得る訳である。

このような系  $(A+B)$  — 全系は孤立しているとする — の Hamiltonian は

$$H^\lambda = H_A \otimes 1 + 1 \otimes H_B + \lambda V \quad (10)$$

で与えられる。熱浴は無限自由度系であるので、代数的取扱いを要する。具体的には、例えば、Hilbert 空間  $\mathcal{H}_B$  中の有界作用素全体 ( $B(\mathcal{H})$  と書く) の代数 (部分代数も可) である。Hamiltonian  $H_B$  は、定常状態  $\omega_B$  で決められた表現でみたときの free Hamiltonian であり、Hilbert 空間  $\mathcal{H}_B$  は  $\omega_B$  に依存して決められる。  $T(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$  を  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  上の trace class operators の全体 (Banach 空間) とする。

$T(\cdot)$  での力学は、Liouville 演算子  $\mathcal{L}^\lambda = -i[H^\lambda, \circ]$  を用いて記述される。熱浴の自由度に関する trace をとることで、系 A の reduced dynamics  $t \rightarrow A_t$  が得られる。  $A_t = e^{Lt}$  で書ける。

$$\frac{\partial}{\partial t} W(t) = \mathcal{L}^\lambda W(t), \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L(\rho(t)), \quad (11)$$

但し、  $\rho(t) = \text{tr}^{(B)} W(t)$  である。一般には、  $\rho(t)$  の運動方程式は memory 効果を示すが、(1) van Hove の weak-coupling limit の場合と (2) 熱浴の時間相関が  $\delta$ - 関数となる (singular reservoir limit という) 場合には、Markov 型をとることが証明されている。

不可逆過程の理論は多くの場合物理的要請を足場としており、そこで用いた種々の近似の正当性を保証することが必要であった。具体的モデルにおいて、例えば、数値計算によってある程度まで近似の正当性等を理解することはできた。これとは対照的に、van Hove の方法は理想化された物理系に対してであるが数学的に厳密な取扱いを可能にした。この点は絶大である。熱浴に接した系での van Hove 理論の応用は、まず熱浴との相互作用のよく判っている系でまず行われた [ref. 19]。一方、Kossakowski は、半群的法則を非 Hamiltonian 系の基本的特性とみた [ref. 14]。彼の理論では、系の環境というものがきわめて曖昧なものにまで抽象化されているが、このことは、除外し去ることのできない環境からの作用が常に存在するという意味で、真性に孤立した系というものは考え難いということに基づく。以下に、そこでの数学的定式化を素描する。

#### [定義 1 : dynamical semigroup]

$\mathcal{A}$  を  $W^*$  代数とする。  $\Phi_t$  を  $\mathcal{A}$  からそれ自身への写像とする。  $\Phi_t$  が次の条件を満たすとき半群という：

- a)  $\Phi_t$  は正值である。      b)  $\Phi_t(I) = I$       c)  $\Phi_s \cdot \Phi_t = \Phi_{s+t}$
- d)  $\Phi_t(X) \rightarrow X$  ultraweakly,  $t \rightarrow 0$       e)  $\Phi_t$  は正規 (弱連続)

この条件下では、次で定義される写象  $L$  が存在する：

$$\lim_{t \downarrow 0} \|LX - t^{-1}(\Phi_t X - X)\| = 0 \quad (12)$$

(11) 式に用いたように部分的な trace をとることで、縮約された力学を扱うことになる。そこで、「逆問題」を考えてみる。今、  $\Phi_t^A$  を  $B(\mathcal{H}_A) \rightarrow B(\mathcal{H}_A)$  なる写像とする。  $\text{posi. map } \Phi; B(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) \rightarrow B(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$  とするとき、系 B の方に何の変化も及ぼさない条件下で  $\Phi_t^A$  を  $\Phi$  にまで拡大できるかという問題である。系 A の動力学が Hamilton 的ならば自明であるが、non-Hamiltonian であっても答は Yes である：この場合は、  $\Phi(X \otimes I) = \Phi_A(X) \otimes I$ ,  $\Phi(I \otimes Y) = I \otimes Y$  となる。

#### [定義 2 : 完全正定値写像 (CP map)]

$M_n(\mathcal{A})$  を  $C^*$  代数  $\mathcal{A}$  の  $n \times n$  行列の代数とする。  $\mathcal{B}$  も  $C^*$  代数とする。写像  $\Phi; \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}$  が  $\Phi_n(X \otimes$

$E_{ij}) = \Phi(X) \otimes E_{ij}$  ( $E_{ij}$ ; matrix units) に拡大できる。 $\Phi_n$  が全ての  $n$  で positive  $\leftrightarrow \Phi$  は CP である。

dynamical semigroup の generator の一般形は Lindblad [ref. 22] によって与えられた (Lindblad generator) :

$$L\rho = -i[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_j \{ [V_j, \rho V_j^*] + [V_j \rho, V_j^*] \}. \quad (13)$$

$V_j$  は有界演算子である。 $\sum V_j^* V_j$  は収束 (ultra weakly) するとする。系が  $N$  準位の場合には、次のように与えられる [ref. 23]。

$$L\rho = -i[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{N^2-1} c_{ij} \{ [F_i, \rho F_j^*] + [F_i \rho, F_j^*] \}. \quad (14)$$

但し,  $\text{tr}(H) = \text{tr}(F_j) = 0$ ,  $\text{tr}(F_i^* F_j) = \delta_{ij}$ .  $c_{ij}$  は任意の positive matrix である。

van Hove limit の現れ方を次に見ておこう。Hamiltonian (10) で  $V = Q \otimes F$  とする。Liouville eq. (11) の初期条件を  $W(0) = \rho \otimes \rho_C^B$  とする。熱浴  $B$  の方の状態は KMS 状態であったとする。縮約された系の運動は次のようになる：

$$T_t^\lambda \rho = \text{tr}^{(B)} \{ e^{-iH^\lambda t} \rho \otimes \rho_C^B e^{iH^\lambda t} \}. \quad (15)$$

<定理, Davies [ref. 19]>

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \sup_{0 \leq \lambda^2 t \leq \tau} \| T_t^\lambda \rho - e^{(-i[H, 0] + \lambda^2 K)t} \rho \|_1 = 0 \quad (16)$$

ここで

$$K\rho = \int_0^\infty dt \{ h^*(t) [Q(-t), \rho Q] + h(t) [Q\rho, Q(-t)] \}, \quad (17)$$

$$h(t) = \text{tr}^{(B)} \rho_C^B F F(t). \quad (18)$$

(16) 式は系  $A$  の散逸過程を支配する時間が  $\lambda^2 t = \tau$  とスケール変換されることを示している。(16) 式の極限の存在を連続スペクトルの場合に示すことは未だ未解決とされている。

ここでのモデルの特徴の一つは、generator  $L$  が熱浴の変数のみでなく Heisenberg operator  $Q(-t)$  に依存する点である。Kossakowski 等 [ref. 28] は、次の事柄を証明した：

(1)  $B$  (KMS 状態) + van Hove limit

$\Rightarrow$  系  $A$  は Gibbs ensemble に関して詳細釣り合を満たす。

(2)  $A$  (詳細釣り合) + van Hove limit

$\Rightarrow$  熱浴  $B$  の熱力学的状態は KMS 条件を満たす。

#### §4 Singular Reservoir [ref. 18, 24, 25]

(18) 式でスケール変換  $\lambda^{-2} t$  を用いると熱浴の相関関数として  $\lambda^{-2} \langle F \cdot F(\lambda^{-2} t) \rangle_B$  を得る。そこで  $\lambda$

$\rightarrow 0$  とすると相関関数は  $\delta(t)$  に比例する。この極限を singular coupling limit という。この種の熱浴は系に対する量子化された白色雑音を意味する。

<定理, Palmer [ref. 27]>

(a) singular coupling の Hamiltonian は、次と同等である。

$$H_\lambda = \lambda^2 H_A \otimes I + \lambda V + I \otimes H_B. \quad (10')$$

(b) 系 A の generator  $L$  は次で与えられる

$$L\rho = -i[H, \rho] + is[Q^2, \rho] + h[Q, [Q, \rho]], \quad (19)$$

ここで

$$h + is = \int_0^\infty dt h(t). \quad (20)$$

Hamiltonian (10') の含意は、系に固有な運動とそこでの散逸機構とが同じ order (即  $\lambda^2$  の order) であるということである。また (19) に示す generator の散逸に関与する部分は、系の固有運動と無関係である点に注意する。上記の定理は、singular limit と見做すか weak limit と見做すかという事は、どの時間スケールを自然な尺度と見做すかという事によっていることを述べている。すなわち

$$\exp\{iH_\lambda t\} = \exp\{i\mathcal{H}^\lambda \tau\}, \quad \tau = \lambda^2 t \quad (21)$$

ここで  $\mathcal{H}^\lambda = H_A \otimes I + \lambda^2 I \otimes H_B + \lambda^{-1} V$  である。この場合、系 A の方の Hamiltonian のスペクトルは、離散的でも連続的でも何れであつてもよい。

## §5 相対エントロピー

以上で完全正写像による不可逆性を示す力学の定式化の解説をひとまず終えたことにする。しかし、非平衡系熱力学を上述の観点から考察することは有意義と思われるので、まず、エントロピー生成の扱いをみておきたい。事の性質上、以下では殆んど“物理の言葉”を用いることにする。

まず、全体系 (A+B) の密度行列  $W(t)$  に対する運動方程式 (11) から出発する。初期条件は  $W(t) = \exp\{\beta[\Psi_A - H] + \beta'[\Psi_B - R]\}$  とする。( $H = H_A \otimes I$ ,  $R = I \otimes H_B$ )。即、 $t < 0$  においては各々温度  $\beta$ ,  $\beta'$  の平衡状態にあった系を  $t \geq 0$  で接触さす訳である。相互作用表示を用いて、 $W_I(t) = \exp(-itR)W(t)\exp(itR)$  として、

$$\frac{\partial}{\partial t} W_I(t) + i[H + \lambda V(t), W_I(t)] = 0, \quad (11')$$

を得る。但し、 $V(t) = \exp(itR)V\exp(-itR)$  である。

系の自由エネルギーの時間変化は

$$dQ/dt = -\frac{d}{dt} \text{tr} W_I(t) H \quad (21)$$

であるが、 $(A+B)$ は孤立系であるので、この値は熱浴のエネルギー変化に等しい。一方系Aの非平衡エントロピーは次の式で定義される：

$$S^\lambda(t) = -\text{tr}^{(A)} \rho^\lambda(t) \ln \rho^\lambda(t), \quad (22)$$

但し、 $\rho^\lambda(t) = \text{tr}^{(B)} W(t)$ である。従って系でのエントロピー生成は

$$\sigma^\lambda(t) = dS^\lambda(t)/dt - \beta dQ/dt. \quad (23)$$

一方、相対エントロピー

$$S^\lambda(\rho^\lambda(t)|\rho(0)) = -\text{tr}^{(A)} \rho^\lambda(t) \{ \ln \rho^\lambda(t) - \ln \rho(0) \} \leq 0 \quad (24)$$

は、系AのH函数の役割をもち、エントロピー生成は

$$\sigma^\lambda(t) = \frac{d}{dt} S^\lambda(\rho^\lambda(t)|\rho(0)) \geq 0$$

となる。この値が正であることは、 $\rho^\lambda(t)$ が dynamical semigroup lawに支配されることの結果である [ref. 30]。

(11')式の一般解は

$$W_I(t) = \exp \{ \beta [\psi_A - H] + \beta' [\psi_B - R] + \Psi^\lambda(t) \}, \quad (25)$$

$$\Psi^\lambda(t) = i \int_0^t dt' U_\lambda(t, t') [\lambda V(t'), \beta H + \beta' R] U_\lambda^{-1}(t, t'). \quad (26)$$

但し、 $U_\lambda$ は $-i[H + \lambda V(t), \cdot]$ による発展の演算子である。全系 $(A+B)$ の相対エントロピーを

$$\bar{S}^\lambda(W_I(t)|W_I(0)) = -\text{tr} W_I(t) \{ \ln W_I(t) - \ln W_I(t_0) \}, \quad (24')$$

と定義すると

$$\beta \text{tr} W_I(t) [\lambda V(t), iH] = -\beta' \frac{d}{dt} \text{tr} W_I(t) R - \frac{d}{dt} \bar{S}^\lambda(\cdot|\cdot) \quad (27)$$

が導かれる。従って(24)と(24')の物理として、van Hove limitで

$$\begin{aligned} \sigma^\lambda(\lambda^{-2}\tau) &= \beta \text{tr} W_I(\lambda^{-2}\tau) [\lambda V(\lambda^{-2}\tau), iH] \\ &= -\lambda^2 \text{tr}^{(A)} (K \rho^\lambda(\lambda^{-2}\tau)) \ln \rho^\lambda(\lambda^{-2}\tau) \beta \end{aligned} \quad (28)$$

を得る。相対エントロピーから、エントロピー生成を定義することの有力さが証明された訳である。

同様の手法は、時間に依存する外場に対する系Aの応答（一般に非線型まで含められる）の取扱いにも応用できる。出発点となる方程式は、



$$\frac{\partial}{\partial t} D(t) + i [H - A \cdot F(\lambda^2 t) + \lambda V + R, D(t)] = 0, \quad (29)$$

である。ここで外場は系 A の物理量とのみ相互作用できるとした。上述と同様に相対エントロピーを経由して、エントロピー生成を求めると次のようになる：

$$\frac{d}{d\tau} S(\tau; 0) = \beta J(\tau) F(\tau) - P^{(\text{semi})}(\tau) \quad (30)$$

となる。但し、 $\tau = \lambda^2 t$  であり、 $J(\tau)$  は  $i[H, A]$  の応答、 $S(\tau; 0)$  はエントロピー

$$S(\rho'_\lambda(t)) = -\text{tr}^{(A)} \rho'_\lambda(t) \ln \rho'_\lambda(t)$$

の van Hove limit での値である。また

$$P^{(\text{semi})}(\tau) = \text{tr} D_I(\lambda^{-2}\tau) [iH, V(\lambda^{-2}\tau)] \geq 0 \quad (31)$$

は dynamical semigroup law に支配されるエントロピー生成であって、正であることはすでに示した。

(30) 式の物理は、次の事を特別の場合として含む。すなわち、 $\beta' = \beta$  とすれば（これは丁度、応答理論の設定条件である）、(30) 式は、Boltzmann 方程式から導出されるエントロピー生成に関する式

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} = \left( \frac{\partial S}{\partial \tau} \right)_d + \left( \frac{\partial S}{\partial \tau} \right)_c \quad (32)$$

に対応する。但し、Boltzmann 方程式の場合と異なり、時間はスケール変換されている。第一項は外場によるドリフト項、第二項は衝突項である。

## § 6 まとめにかえて

熱力学第 2 法則は、従来、動力学上に施されたある種の近似法に基因するとされてきた。従って、多分に擬人的な性格とされてきた。典型的には、「不可逆性とは、我々の知識の欠如を基本法則に対して公然と導入した結果生じた帰結 (M. Born)」とされた。半群的法則による定式化は、近似法という消極的な見方をはなれて熱力学に矛盾しない動力学を得ようとする立場である。事実、Sudarshan ら [Phys. Rev. 121 (1961) 920] は第 2 法則を基本的物理的事実であると前提し、動力学の概念にどのような変更を行えばよいかを考えた。しかしながら、彼らの分析では、系の初期状態に関しての「情報の消失」が主要な内容となっており、いまだ擬人的面は克服されていない [Nuovo Cim. 11B ('72) 215 も参照]。

不可逆過程の微視的理論は、たしかに時間・空間についての研究を要求している Newton 力学的自然観に立つ限り、存在する時空は一種類だけ（絶対時空）ということになり、それ以上時空の構造は問題にしない。しかしながら、自然界には、力学原理と熱力学的原理という具合に、階層がことごと異なる自然法則が支配することは物理的事実として前提するならば、そこに現れた時空というものは同一ではないであろう [町田茂氏の見解]。ミクロ時空とマクロ時空とは形式においては異ならないであろうが、その構造は同一でない。ここで示した場合ならば、時空の構造は、van Hove limit によって取り出せる訳である。両者の違いは、時空的属性を計るのに用いられる物質的相互作用の構造が客観的に異なるこ

とに基因するものであって、決して擬人的性格のものではない。

統計力学の分野で数学的にも厳密に確立された van Hove の方法と同種のものに、次の二つがよく知られている：

- (1)  $\lambda^{-2}t$ ,  $\lambda^{-2}q$  ( $\lambda \rightarrow 0$ ) ; Euler 方程式を得る
- (2)  $\lambda^{-2}t$ ,  $\lambda^{-4}q$  ( $\lambda \rightarrow 0$ ) ; Navier-Stokes 方程式

これらに関しては、最近の review [A. deMasi, et al. ; A Survey of the Hydro-dynamical Behavior of Many-Particle System, Studies in Stat. Mech, Vol. 11 (1984), by J. Lebowitz and E. Montroll (North-Holland)] を参照されたい。

van Hove の不可逆過程論の語るところは、「時間のスケールを変えるとき、常に物理系の階層構造が見えてくる」ということであり、時間スケールの違いは、質的差違をもたらすということなのである [小嶋氏；研究会報告]。勿論、時間スケールの変換は、空間スケールの変換をも指定するはずのものであるし、 $\langle \lambda^2 t = \tau \rangle$  型のものだけではないであろう。この型のものは、基本的に不可逆過程のうちの Wiener 過程 [ref. 14 を参照] である。しかしながら、この研究会で並木美喜雄氏 (早大) が論じられたように、もう一つの階層 (Ornstein-Uhlenbeck 過程) を識別する必要がある場合もある。この階層を扱う微視的理論はまだ確立されていないようである。筆者の考えでは、この方向での理論の候補の一つは Prigogine 学派の sub-dynamics ( $\lambda$  変換) 理論であろう。彼らの見解と異って、筆者は何らかの時空間スケールの変換という概念が彼らの理論には含まれているとする Obcemea 等 [ref. 36] に同意する。

## <文 献>

L. van Hove の一連の論文

- 1) Quantum-Mechanical Perturbations Giving Rise to A Statistical Transport Equation; Physica 21 (1955) 517-540.
- 2) Energy correlations and Persistent Perturbation Effect in Continuous Spectrum; Physica 21 (1955) 901-923.
- 3) “: II, The perturbed stationary states; Physica 22 (1956) 343-354.
- 4) The Approach to Equilibrium in Quantum Statistics; Physica 23 (1957) 441-480.
- 5) The Ergodic Behavior of Quantum Many-Body Systems; Physica 25 (1959) 268-276.
- 6) The Generalized Transport Equation for An Electron; Physica 27 (1961) 418-432.
- 7) N. G. van Kampen : Quantum Statistics of Irreversible Processes, Physica 20 (1954) 603-622.

初期の応用例

- 8) N. M. Hugenholtz: Perturbation Theory of Large Quantum Systems, Physica 23 (1957) 481-532.
- 9) N. M. Hugenholtz: Perturbation Approach to the Fermi Gas Model of Heavy Nuclei, Physica 23 (1957) 533-545.

研究会報告

- 10) N. M. Hugenholtz and L. van Hove: A Theorem on the Single Partical Energy in a Fermi Gas with Interaction, *Physica* **34** (1958) 363-376.
  - 11) L. van Hove: Master Equation and Approach to Equilibrium for Quantum Systems, in *Fundm. Prob. Stst. Mech.* (by E. Cohen, 1961) pp157-172.
  - 12) N. G. van Kampen: Fundamental Problems in Statistical Mechanics of Irreversible Processes. pp173-202.
- 新展開 (年代順, \* 印は総合報告)
- 13) G. Emch and G. Sewell: Nonequilibrium Statistical Mechanics of Open Systems, *J. Math. Phys.* **9** (1968) 946-958.
  - 14) A. Kossakowski: On Quantum Mechanics of Non-Hamiltonian Systems. *Rep. Math. Phys.* **3** (1972) 247-274.
  - 15) O. Lanford and D. Robinson: Approach to Equilibrium of Free Quantum Systems, *Comm. Math. Phys.* **24** (1972) 193-210.
  - 16) P. Bongaarts, M. Fannes and A. Verbeure: A Remark on Ergodicity, Dissipativity, Return to Equilibrium, *Physica* **68** (1973) 587-594.
  - 17) D. Robinson: Return to Equilibrium, *Comm. Math. Phys.* **31** (1973) 171-189.
  - 18) K. Hepp and E. Lieb: Phase Transitions in Reservoir-Driven Open Systems with Appllications to Laser and Superconductors, *Helv. Phys. Acta* **46** (1973) 573-603.
  - 19) E. B. Davies: Markovian Master Equations, *Comm. Math. Phys.* **39** (1974) 91-110.
  - 20) J. Pule: The Bloch Equations, *Comm. Math. Phys.* **38** (1974) 241-256.
  - 21) P. Martin and G. G. Emch: A Rigorous Model Sustaining van Hove's Phenomena, *Helv. Phys. Acta* **47** (1975) 59-78.
  - 22) G. Lindblad: On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups, *Comm. Math. Phys.* **57** (1976) 119-130.
  - 23) V. Gorini and A. Kossakowski: Completely Positive Dynamical Semigroups of N-Level Systems, *J. Math. Phys.* **17** (1976) 821-825.
  - 24) " : N-Level System in Contact with a Singular Reservoir, *J. Math. Phys.* **17** (1976) 1298-1305.
  - 25) A. Frigerio and V. Gorini: " , II, *J. Math. Phys.* **17** (1976) 2123-2127.
  - 26)\* R. Alicki: On the Detailed Balance Conditions for Non-Hamiltonian Systems, *Rep. Math. Phys.* **10** (1976) 247-258.
  - 27) P. F. Palmer: The Singular Coupling and Weak Coupling Limits, *J. Math. Phys.* **18** (1977) 527-529.

- 28) A. Kossakowski, A. Frigerio, V. Gorini and M. Verri: Quantum Detailed Balance and KMS Condition, *Comm. Math. Phys.* **57** (1977) 97-110.
- 29)\* H. Spohn and J. L. Lebowitz: Irreversible Thermodynamics for Quantum Systems Weakly Coupled to Thermal Reservoirs, *Adv. in Chem. Phys.* **28** (1978) 109-142.
- 30) E. B. Davies and H. Spohn: Open Quantum Systems with Time-Dependent Hamiltonians and their Linear Response, *J. Stat. Phys.* **19** (1978) 511-523.
- 31)\* V. Gorini et al: Properties of Quantum Markovian Master Equations, *Rep. Math. Phys.* **13** (1978) 149-172.
- 32) H. Spohn: Entropy Production for Quantum Dynamical Semigroup, *J. Math. Phys.* **19** (1978) 1227-1230.
- 33) K. van Vliet: Linear Response Theory Revisited.  
     I, The Many-Body van Hove Limit, *J. Math. Phys.* **19** (1978) 1345-1370.  
     II, The Master Equation Approach,       "       **20** (1979) 2573-2595.
- 34)\* O. Penrose: Foundations of Statistical Mechanics, *Rep. Prog. Phys.* **42** (1979) 1937-2006.
- 35)\* H. Spohn: Kinetic Equations from Hamiltonian Dynamics: Markovian Limits, *Rev. Mod. Phys.* **53** (1980) 569-615.
- 36) C. Obcemea and E. Brandas: Analysis of Prigogine's Theory of Subdynamics, *Ann. Phys.* **151** (1983) 383-430.
- 37)\* G. Lindblad: Nonequilibrium Entropy and Irreversibility  
     (D. Reidel Publishing Company, Dordrecht; 1983)